

第一原理計算を用いた強誘電体材料の物性予測

【背景】材料開発

従来

トライアル&エラー

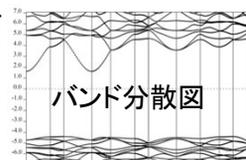
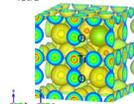


近年

計算科学の活用



電子密度分布



「計算科学による予測を元にした実験」や
「実験結果の計算科学による説明」が始まっている。

【目的】

第一原理計算(*)を用いて物性値の算出を行い、材料開発に役立てる。

(*) 第一原理計算: 原子の配列のみから物性を予測する手法

コンデンサ等の電子部品に利用される代表的な強誘電体材料であるチタン酸バリウム(BaTiO_3)について、第一原理計算を用いた物性値の算出方法について検討するとともに材料について傾向をつかむ。

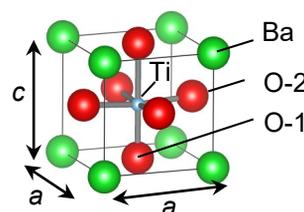


図1 BaTiO_3 の原子配列

【計算結果】

表1 計算結果(補正なし)と実験値の比較

	汎関数	a (Å)	c (Å)	c/a	Bandgap(eV)	Pr ($\mu\text{C}/\text{cm}^2$)
計算結果	PZ	3.94	3.98	1.011	1.84	25.4
計算結果	PBE	3.99	4.20	1.053	1.83	47.3
計算結果	PBE-sol	3.96	4.05	1.022	1.84	34.2
実験値		3.99	4.04	1.013	3.20	27.3

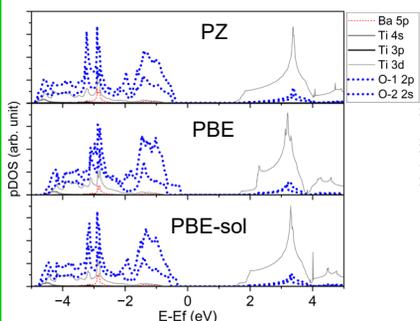


図2 部分状態密度計算結果

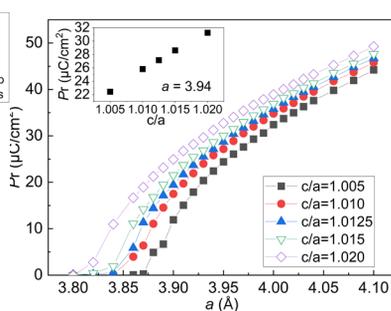


図3 格子定数と残留分極値Pr

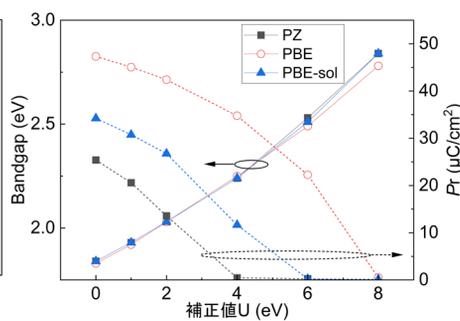


図4 補正值Uによる計算結果の変化

【分かったこと】

<計算方法について>

BaTiO_3 については、計算に使用する汎関数はPZやPBE-solが良い。(表1、図2)
得たい物性値に応じて適切に補正を使用する必要がある。(図4)

<材料について>

強誘電特性を良くするためにはc/a比を大きくしたり、
格子定数を大きくすることが有効 (図3)

今後、他の材料系での物性値の評価へと広げる。